



École Doctorale SCIENCES ET INGÉNIERIE
DES MATÉRIAUX, MÉCANIQUE, ÉNERGÉTIQUE

Développement d'une approche détaillée de modèle de pyrolyse avec prise en compte du couplage intra-pore solide - gaz

Institut Pprime / Département : Fluides, Thermique et Combustion (FTC)
Equipe : Combustion Hétérogène et Milieux poreux (CH)

Directeur de thèse : Thomas ROGAUME

Co-encadrants : Franck RICHARD, Benjamin BATIOT

Contact pour information : benjamin.batiot@univ-poitiers.fr, franck.richard@univ-poitiers.fr

Thèse : 80% modélisation numérique, 20% expérimentation

Contexte :

Nous développons depuis plusieurs années des outils innovants de caractérisation expérimentale et de calcul numérique des incendies. Ces travaux visent à mieux comprendre les facteurs fondamentaux influençant la dynamique de naissance et de propagation des incendies. Les modèles développés s'appuient sur une expertise expérimentale importante. Ils permettent notamment de décrire le comportement d'un matériau solide lorsqu'il est soumis à une agression thermique ainsi que les interactions aux interfaces entre la phase condensée et la phase gazeuse de combustion. L'ensemble de ces travaux ont permis d'identifier des verrous scientifiques importants sur les aspects fondamentaux de la décomposition thermique des matériaux solides. En effet, la plupart des modèles de pyrolyse mettent en jeu une réaction globale de pyrolyse et les phénomènes de couplages aux interfaces sont traités par des modèles globaux. Ces modèles ne permettent pas de capter correctement les phénomènes transitoires lorsque la combustion d'un solide passe d'une cinétique chimique infiniment rapide à une cinétique plus lente où les phénomènes de couplages entre les processus de réaction chimique, de transferts de chaleur et de transport de masses au sein d'un solide poreux deviennent importants. Lorsque les échelles caractéristiques de temps et de longueurs de ces phénomènes deviennent du même ordre de grandeur, le mécanisme réactionnel doit être suffisamment détaillé afin de décrire correctement ces phénomènes de couplage.

Les modèles numériques développés reposent sur le code PATO (Porous Analysis Toolbox based on Openfoam), développé à partir de la plateforme OpenFOAM. Ce code a été développé initialement par la NASA et continu à être utilisé dans le cadre du développement des boucliers thermiques des véhicules spatiaux. Ce code a donc été adapté et est utilisé dans le cadre de la modélisation de la combustion de matériaux solide dans des conditions d'incendie.

Un modèle 3D complet a déjà été développé et appliqué au cas de la pyrolyse du bois. Il prend en compte les phénomènes de transferts de chaleur, de transport de masses à l'échelle de « Darcy » ainsi que la réaction chimique décrite par un mécanisme à 3 étapes indépendantes. Même si les résultats sont très encourageants, le modèle atteint ses limites lorsque les couplages entre les différents processus précités (transfert de chaleur, transport de masse, réaction chimique) deviennent trop forts.

Objectifs de la thèse :

Le travail proposé dans le cadre de ce doctorat consiste à décrire le phénomène de réaction chimique se produisant lors de la décomposition thermique des matériaux solides cellulosiques tels que le bois ou d'autres dérivés (fibre, laine de bois), par une approche multi-réactionnelle détaillée couplant des réactions concurrentes et compétitives. Le mécanisme réactionnel développé dans le cadre de cette étude pourra se baser sur le modèle développé par Ranzy & al (2008), modèle de référence le plus détaillé à l'heure actuelle regroupant plusieurs dizaines de réactions de décomposition de la cellulose, de l'hémicellulose et de la lignine.

Cependant, ce type d'approche détaillée génère la difficulté d'identification des paramètres thermochimiques des phases condensées intermédiaires. Ce point sera traité par une approche expérimentale innovante consistant à caractériser ces espèces intermédiaires à l'échelle locale. Plusieurs bancs expérimentaux (Analyse Thermo – Gravimétrique, Cône Calorimètre) seront mobilisés, couplés à des analyses chimiques en chromatographie en phase gazeuse et / ou à infrarouge à transformée de Fourier.

Les modèles numériques développés dans les études précédentes ont considéré les gaz de pyrolyse comme étant un gaz « inerte » et transporté par diffusion ou convection au sein du solide poreux sans aucune réaction au sein des pores du solide. Ce modèle sera amélioré en considérant le « gaz de pyrolyse » généré par les réactions de pyrolyse comme étant un mélange d'hydrocarbures plus ou moins légers (CH_4 , H_2 , C_2H_2 , C_2H_4 ...) pouvant se transporter au sein de la matrice solide et ainsi réagir par mélange avec l'air du milieu environnant pouvant diffuser au sein des pores du solide.

Dans un premier temps, cette chimie en phase gazeuse à l'intérieur des pores du solide sera décrite au sein du modèle avec une hypothèse de chimie infiniment rapide en utilisant des modèles de chimie à l'équilibre (minimisation de l'énergie de Gibbs). Par la suite, ces modèles de chimie à l'équilibre seront remplacés par des modèles de chimie non infiniment rapides où les réactions en phases gazeuses seront décrites au sein du modèle.

Le transport de masse à l'échelle de Darcy ainsi que le transfert de chaleur seront pris en compte dans le modèle développé. Les échanges entre le solide et le gaz seront considérés et l'hypothèse de l'équilibre thermique locale prise dans la plupart des modèles sera étudiée selon différentes configurations de pyrolyse. Les échanges convectifs seront considérés entre les phases solides et gazeuses au sein du solide pourront éventuellement être pris en compte.

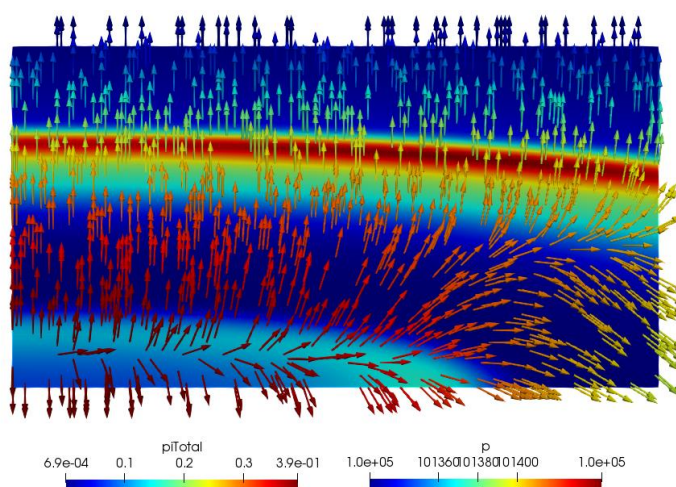


Figure 1 : Dynamique du front de pyrolyse lors de la combustion du bois